2º SEMESTRE: CÁLCULO NUMÉRICO CON FORTRAN.

TEMARIO:

- 1. Sistemas lineales
 - 1. 1. Métodos directos
 - 1. 2. Métodos iterativos
- 2. Cálculo de Autovalores
- Derivación e Integración Numérica.
- 4. Ecuaciones y Sistemas no Lineales.
- 5. Ecuaciones Diferenciales Ordinarias.

Resolución de sistemas de ecuaciones lineales

Sistema de m ecuaciones con n incognitas

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots & a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots & a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots & & \ddots & & \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i \ i = 1, \dots n \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots & a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Forma matricial

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad AX = B$$

Resolución de sistemas de ecuaciones lineales

¿Cómo despejamos el valor de X en la expresión AX = B?

Desde un punto de vista matemático bastará con hallar la inversa de A.

$$AX = B \Rightarrow A^{-1}AX = A^{-1}B \Rightarrow X = A^{-1}B$$

El problema ahora consiste en hallar la inversa de una matriz... ¿Existe siempre?

Compatibilidad de un sistema lineal de ecuaciones. Teorema de Rouche.

Rango(A) \neq Rango(AB) \Leftrightarrow el sistema es incompatible

Rango(A)=Rango(AB) = t \Leftrightarrow el sistema es compatible

Rango(A)=Rango(AB) = t = n \Leftrightarrow el sistema es compatible y determinado (1! solución)

Rango(A)=Rango(AB) = t < n \Leftrightarrow el sistema es compatible e indeterminado (∞ soluciones)

(*n* número de incognitas)

Clasificación de los métodos de resolución:

DIRECTOS

- Gauss
- Gauss-Jordan
- Factorización LU

ITERATIVOS

- Jacobi
- Gauss-Seidel

Clasificación de los métodos de resolución:

DIRECTOS

- Gauss
- Gauss-Jordan
- Factorización LU

☐ Métodos directos.

Son exactos (no tienen asociado error de truncamiento), y son usados cuando la mayoría de los coeficientes de A son distintos de cero y las matrices no son demasiado grandes.

Suelen ser algoritmos 'complicados de implementar'

Clasificación de los métodos de resolución:

■ Métodos indirectos o iterativos:

Tienen asociado un error de truncamiento y se usan normalmente para matrices grandes (n>>1000) cuando los coeficientes de A son la mayoría nulos –matrices *sparse*-.

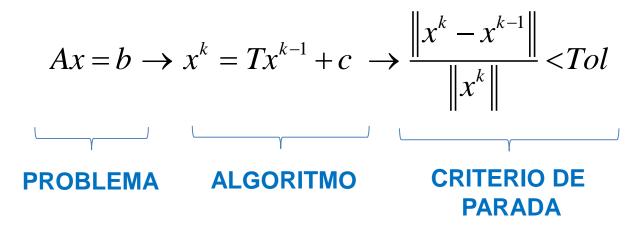
Algoritmos sencillos de implementar que requieren aproximación inicial y que en general no tienen porqué converger (requieren análisis de convergencia previo).

ITERATIVOS

- Jacobi
- Gauss-Seidel

Métodos Iterativos: Generalidades

 Partiendo de una solución inicial aplican iterativamente un algoritmo hasta que se cumple un criterio de parada.



 La convergencia no está garantizada. Veremos luego condiciones suficientes que garantizan la convergencia a la solución y casos donde la solución no converge.

Métodos Iterativos: Generalidades

• Si el método converge lo hace de forma lineal.

Error relativo =
$$\frac{\left\|x^{k} - x^{k-1}\right\|}{\left\|x^{k}\right\|}$$
 decae de modo lineal (lento, muchas iteraciones)

 Cuando el sistema es muy poco denso (la matriz A tiene muchos elementos cero) las operaciones matriz por vector son muy rápidas y estos métodos son mas eficientes que los directos.

$$Ax = b \rightarrow x^{k} = Tx^{k-1} + c$$

A "sparse" \longrightarrow T "sparse" (sparse = poco densa)

Métodos Iterativos: Conocimientos previos

 Para hallar el error cometido y para estudiar la convergencia necesitamos trabajar con normas de vectores y de matrices:

En un espacio vectorial euclídeo se define norma de un vector:

 $\|\vec{x}\|$: V $\to \mathbb{R}$ una aplicación cumpliendo:

- $\|\vec{x}\| \ge 0$
- $\operatorname{Si} \|\vec{x}\| = 0 \iff \vec{x} = \vec{0}$
- $\|\alpha\vec{x}\| = |\alpha|\|\vec{x}\|$
- $\|\vec{x} + \vec{y}\| \le \|\vec{x}\| + \|\vec{y}\|$

Métodos Iterativos: Conocimientos previos

 Para hallar el error cometido y para estudiar la convergencia necesitamos trabajar con normas de vectores y de matrices:

Ejemplos:

$$\|\vec{x}\|_{2} = (x_{1}^{2} + x_{2}^{2} + \dots x_{n}^{2})^{1/2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_{i}^{2}}$$
$$\|\vec{x}\|_{\infty} = \max_{i=1,\dots,n} |x_{i}|$$

La norma induce el concepto de distancia entre vectores:

$$d(\vec{x}, \vec{y})_{2} = \|\vec{x} - \vec{y}\|_{2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_{i} - y_{i})^{2}}$$
$$d(\vec{x}, \vec{y})_{\infty} = \|\vec{x} - \vec{y}\|_{\infty} = \max_{i=1,...,n} |x_{i} - y_{i}|$$

Métodos Iterativos: Conocimientos previos

 Para hallar el error cometido y para estudiar la convergencia necesitamos trabajar con normas de vectores y de matrices:

Norma de matrices:

Norma infinito:
$$||A||_{\infty} = \max_{i=1,...,n} \left| \sum_{j=1}^{n} A_{ij} \right|$$

Norma de Frobenius:
$$||A||_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |A_{ij}|^2} = \sqrt{traza(A^*A)}$$

Dada una matriz diagonalizable
$$A = CDC^{-1}$$
 con $D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \lambda_2 & \\ & & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}$

se define radio espectral de A como $\rho(A) = \max_{i=1,\dots,n} |\lambda_i|$

Métodos Iterativos: Método de JACOBI

Partimos del sistema original

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots & a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots & a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots & & \ddots & \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots & a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Despejamos en cada ecuación una incógnita:

$$\begin{cases} x_1 = (b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \dots - a_{1n}x_n) / a_{11} \\ x_2 = (b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - \dots - a_{2n}x_n) / a_{22} \\ \vdots \\ x_n = (b_n - a_{n1}x_1 - a_{n2}x_2 - \dots - a_{nn-1}x_{n-1}) / a_{nn} \end{cases}$$

Métodos Iterativos: Método de JACOBI

- Necesitamos que los elementos de la diagonal sean distintos de cero.
 Si alguno fuese cero cambiamos filas en el sistema original.
- Podemos escribir el sistema anterior como un esquema iterativo:

$$\begin{cases} x_1^k = \left(b_1 - a_{12}x_2^{k-1} - a_{13}x_3^{k-1} - \dots - a_{1n}x_n^{k-1}\right) / a_{11} \\ x_2^k = \left(b_2 - a_{21}x_1^{k-1} - a_{23}x_3^{k-1} - \dots - a_{2n}x_n^{k-1}\right) / a_{22} \\ \vdots \\ x_n^k = \left(b_n - a_{n1}x_1^{k-1} - a_{n2}x_2^{k-1} - \dots - a_{nn-1}x_{n-1}^{k-1}\right) / a_{nn} \end{cases}$$

A partir de una solución inicial x^0 para calcular el nuevo valor en la iteración k usamos la solución anterior k-1

Métodos Iterativos: Método de JACOBI

- Todo el proceso anterior se podría re-escribir en forma matricial:
 - Si suponemos que no hay ceros en la diagonal descomponemos A

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{2n} \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 \\ a_{n1} & a_{n2} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{nn} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & a_{1n} \\ 0 & 0 & a_{2n} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = L + D + U$$

Métodos Iterativos: Método de JACOBI

El sistema:

$$\begin{cases} x_1^k = (b_1 - a_{12}x_2^{k-1} - a_{13}x_3^{k-1} - \dots - a_{1n}x_n^{k-1}) / a_{11} \\ x_2^k = (b_2 - a_{21}x_1^{k-1} - a_{23}x_3^{k-1} - \dots - a_{2n}x_n^{k-1}) / a_{22} \\ \vdots \\ x_n^k = (b_n - a_{n1}x_1^{k-1} - a_{n2}x_2^{k-1} - \dots - a_{nn-1}x_{n-1}^{k-1}) / a_{nn} \end{cases}$$

Se puede poner como:

$$\vec{x}^{k} = D^{-1} (b - (U + L) \vec{x}^{k-1})$$

Métodos Iterativos: Método de JACOBI

• Llamando: $D^{-1}b = c$ y $-D^{-1}(U+L) = T$

resulta:
$$\vec{x}^k = T \vec{x}^{k-1} + c$$

 Si el método es convergente (veremos luego cuando lo es) el criterio de parada será:

$$\frac{\left\|x^k - x^{k-1}\right\|}{\left\|x^k\right\|} \le Tol$$

Métodos Iterativos: Método de JACOBI. Implementación

 Para implementar (programar) este método en Fortran primero debemos asegurarnos que no hay ceros en ningún elemento diagonal (cambiamos filas hasta conseguirlo) y a partir de ahí:

```
x = 0.d0 ! X es un vector de n componentes 

<math>x_new = 0.d0

do iter = 1, max iter
```



Métodos Iterativos: Método de JACOBI. Implementación

Falta por implementar el criterio de parada, voy a usar la norma 2:

$$\|\vec{x}\|_{2} = (x_{1}^{2} + x_{2}^{2} + ...x_{n}^{2})^{1/2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_{i}^{2}}$$

```
do iter = 1, max_iter
...
```

enddo

Métodos Iterativos: Método de Gauss-Seidel

 El método de Gauss-Seidel es similar al de Jacobi pero no espera al final de cada iteración para actualizar la variable completa, sino que a medida que se calculan se usan dentro de la misma iteración.

$$\begin{cases} x_1^k = \left(b_1 - a_{12}x_2^{k-1} - a_{13}x_3^{k-1} - \dots - a_{1n}x_n^{k-1}\right) / a_{11} \\ x_2^k = \left(b_2 - a_{21}x_1^k - a_{23}x_3^{k-1} - \dots - a_{2n}x_n^{k-1}\right) / a_{22} \\ \vdots \\ x_n^k = \left(b_n - a_{n1}x_1^k - a_{n2}x_2^k - \dots - a_{nn-1}x_{n-1}^k\right) / a_{nn} \end{cases}$$

Métodos Iterativos: Método de Gauss-Seidel

En notación matricial podemos escribirlo como

$$\begin{cases} a_{11}x_1^k & = b_1 - a_{12}x_2^{k-1} - a_{13}x_3^{k-1} - \dots - a_{1n}x_n^{k-1} \\ a_{21}x_1^k + a_{22}x_2^k & = b_2 - a_{23}x_3^{k-1} - \dots - a_{2n}x_n^{k-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{nn}x_n^k + a_{n1}x_1^k + a_{n2}x_2^k + \dots + a_{nn-1}x_{n-1}^k = b_n \end{cases}$$

$$(D+L)\vec{x}^k = b - (U)\vec{x}^{k-1}$$

Métodos Iterativos: Método de Gauss-Seidel

• Llamando: $(D+L)^{-1}b = c$ y $-(D+L)^{-1}(U) = T$

resulta: $\vec{x}^k = T \vec{x}^{k-1} + c$

 Si el método es convergente (veremos luego cuando lo es) el criterio de parada será:

$$\frac{\left\|x^k - x^{k-1}\right\|}{\left\|x^k\right\|} \le Tol$$

Métodos Iterativos: Método de Gauss-Seidel. Implementación

• En notación matricial requeriría calculo de inversa (costoso) así que procedemos como en Jacobi.

```
x = 0.d0 ! X es un vector de n componentes do iter = 1, max iter
```



enddo

Métodos Iterativos: Ejemplo comparativo

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 + 2x_3 = 6 \\ -x_1 + 11x_2 - x_3 + 3x_4 = 25 \\ 2x_1 - x_2 + 10x_3 - x_4 = -11 \\ 3x_2 - x_3 + 8x_4 = 15 \end{cases}$$

• Que tiene por solución: x = (1, 2, -1, 1)

Usando como solución inicial $x^0 = (0, 0, 0, 0)$

y con tolerancia: $tol = 5 \times 10^{-4}$

los resultados son:

Métodos Iterativos: Ejemplo comparativo: Por Jacobi

Las ecuaciones del proceso iterativo son

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = & \frac{1}{10}x_2^{(k)} - \frac{1}{5}x_3^{(k)} + \frac{3}{5} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{11}x_1^{(k)} + \frac{1}{11}x_3^{(k)} - \frac{3}{11}x_4^{(k)} + \frac{25}{11} \\ x_3^{(k+1)} = -\frac{1}{5}x_1^{(k)} + \frac{1}{10}x_2^{(k)} + \frac{1}{10}x_4^{(k)} - \frac{11}{10} \\ x_4^{(k+1)} = & -\frac{3}{8}x_2^{(k)} + \frac{1}{8}x_3^{(k)} + \frac{15}{8} \end{cases}$$

y producen el resultado:

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$x_1^{(k)}$	0	0.6000	1.0473	0.9326	1.0152	0.9890	1.0032	0.9981	1.0006	0.9997	1.0001
$x_{2}^{(k)} \\ x_{3}^{(k)} \\ x_{4}^{(k)}$	0	2.2727	1.7159	2.0530	1.9537	2.0114	1.9922	2.0023	1.9987	2.0004	1.9998
$x_{3}^{(k)}$	0	-1.1000	-0.8052	-1.0493	-0.9681	-1.0103	-0.9945	-1.0020	-0.9990	-1.0004	-0.9998
$x_{4}^{(k)}$	0	1.8750	0.8852	1.1309	0.9739	1.0214	0.9944	1.0036	0.9989	1.0006	0.9998

donde hemos parado la iteración en k = 10 al ser

$$\frac{||\mathbf{x}^{(10)} - \mathbf{x}^{(9)}||}{||\mathbf{x}^{(10)}||} = 0.327 \times 10^{-4} < \text{tol}$$

Métodos Iterativos: Ejemplo comparativo: Por Gauss-Seidel

En este caso, las ecuaciones del proceso iterativo son

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = & \frac{1}{10} x_2^{(k)} - \frac{1}{5} x_3^{(k)} + \frac{3}{5} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{11} x_1^{(k+1)} + \frac{1}{11} x_3^{(k)} - \frac{3}{11} x_4^{(k)} + \frac{25}{11} \\ x_3^{(k+1)} = -\frac{1}{5} x_1^{(k+1)} + \frac{1}{10} x_2^{(k+1)} + \frac{1}{8} x_3^{(k+1)} + \frac{1}{10} x_4^{(k)} - \frac{11}{10} \\ x_4^{(k+1)} = -\frac{3}{8} x_2^{(k+1)} + \frac{1}{8} x_3^{(k+1)} + \frac{15}{8} \end{cases}$$

y producen el resultado:

k	0	1	2	3	4	5
$x_1^{(k)}$	0	0.6000	1.0302	1.0066	1.0009	1.0001
$x_2^{(k)}$	0	2.3273	2.0369	2.0036	2.0003	2.000
					-1.0003	
$x_4^{(k)}$	0	0.8789	0.9843	0.9984	0.9998	1.000

donde hemos parado la iteración en k=5 al ser

$$\frac{||\mathbf{x}^{(5)} - \mathbf{x}^{(4)}||}{||\mathbf{x}^{(5)}||} = 2.09 \times 10^{-4} < \text{TOL}$$

Métodos Iterativos: Ejemplo comparativo: Resumen

Por Jacobi hemos obtenido:

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$x_1^{(k)}$	0	0.6000	1.0473	0.9326	1.0152	0.9890	1.0032	0.9981	1.0006	0.9997	1.0001
$x_{2}^{(k)}$	0	2.2727	1.7159	2.0530	1.9537	2.0114	1.9922	2.0023	1.9987	2.0004	1.9998
$x_3^{(k)} \\ x_4^{(k)}$	0	-1.1000	-0.8052	-1.0493	-0.9681	-1.0103	-0.9945	-1.0020	-0.9990	-1.0004	-0.9998
$x_{4}^{(k)}$	0	1.8750	0.8852	1.1309	0.9739	1.0214	0.9944	1.0036	0.9989	1.0006	0.9998

Por Gauss-Seidel:

\overline{k}	0	1	2	3	4	5
$x_1^{(k)}$	0	0.6000	1.0302	1.0066	1.0009	1.0001
$x_2^{(k)}$	0	2.3273	2.0369	2.0036	2.0003	2.000
$x_3^{(k)}$	0	-0.9873	-1.0145	-1.0025	-1.0003	-1.000
$x_4^{(k)}$	0	0.8789	0.9843	0.9984	0.9998	1.000

Métodos Iterativos: Ejemplo comparativo: ¿Conclusiones?

- ¿Es Gauss-Seidel más rápido que Jacobi?
 - En general cuando ambos convergen Gauss-Seidel lo hace más rápido
- ¿Converge Gauss-Seidel mejor que Jacobi?
 - En general Gauss-Seidel converge en más casos que Jacobi.
- ¿Cuáles son las condiciones suficientes de convergencia?

EJEMPLO:
$$\begin{cases} x - 5y = -4 \\ 7x - y = 6 \end{cases}$$

Métodos Iterativos: Ejemplo comparativo: ¿Conclusiones?

• ¿Cuáles son las condiciones suficientes de convergencia?

JACOBI

0	1	2	3	4	5	6	7
0	-4	-34	-174	-1244	-6124	-42,874	-214,374
0	-6	-34	-244	-1244	-8574	-42,874	-300,124

$$\begin{cases} x - 5y = -4 \\ 7x - y = 6 \end{cases}$$

GAUSS-SEIDEL

0	1	2	3	4	5
0	-4	-174	-6124	-214,374	-7,503,124
0	-34	-1224	-42,874	-1,500,624	-52,521,874

Métodos Iterativos: Convergencia

- Ambos métodos pueden converger o divergir independientemente para el mismo problema.
- En ambos métodos usando notación matricial podemos escribir:

$$\vec{x}^k = T \, \vec{x}^{k-1} + c$$

Si la solución es la correcta debe verificar $\vec{x} = T \vec{x} + c$

Restando ambas:
$$\vec{x} - \vec{x}^k = T \vec{x} + c - T \vec{x}^{k-1} - c = T(\vec{x} - \vec{x}^{k-1})$$

Analogamente:

$$\vec{x} - \vec{x}^{k-1} = T(\vec{x} - \vec{x}^{k-2}) \Longrightarrow \vec{x} - \vec{x}^k = T^2(\vec{x} - \vec{x}^{k-2}) \Longrightarrow$$
$$\Longrightarrow \vec{x} - \vec{x}^k = T^k(\vec{x} - \vec{x}^0)$$

Métodos Iterativos: Convergencia

• Si la matriz Tes diagonalizable $T = CDC^{-1}$ con D diagonal

$$T^2 = CDC^{-1}CDC^{-1} = CD^2C^{-1}$$

• • •

$$T^k = CD^k C^{-1}$$

La diferencia entre la solución exacta y la obtenida en la iteración k
depende del comportamiento de la potencia k-esima de la matriz
diagonal.

$$D^k = egin{pmatrix} \lambda_1^k & 0 & \cdots & 0 \ 0 & \lambda_2^k & & 0 \ dots & \ddots & dots \ 0 & 0 & \dots & \lambda_n^k \end{pmatrix}$$

Métodos Iterativos: Convergencia

Se llama radio espectral de una matriz:

$$\rho(A) = \max_{1 \le i \le n} |\lambda_i|$$

 A partir de los resultados anteriores podemos afirmar que una estimación del error absoluto en el paso k del proceso iterativo viene dada por:

$$\left\| \vec{x} - \vec{x}^k \right\| = \rho \left(T \right)^k \left\| \vec{x} - \vec{x}^0 \right\|$$

Es decir la propagación del error inicial depende del radio espectral.

Si queremos que el proceso converja, éste tendrá que ser ho(T) < 1

El método (Gauss-Seidel- Jacobi) que más rápido converja será aquel con menor radio espectral

Métodos Iterativos: Convergencia

Calcular el radio espectral de la matriz lo haremos en el próximo tema.
 De momento usaremos la siguiente condición suficiente:

Si A es estrictamente diagonal dominante, cualquier elección de valor inicial hace que tanto el método de Jacobi como el Gauss-Seidel converja al valor exacto.

$$\left|A_{ii}\right| > \sum_{\substack{j=1 \ j \neq i}}^{n} \left|A_{ij}\right|$$

Métodos Iterativos: Práctica para todos los grupos

Dada la matriz:

$$A_{ii} = 10 + i$$
 $i = 1,..., 10$
 $A_{ij} = -1^{(i+j)}$ $j = 1,..., 10$

Y el vector $b_i = 1$ i = 1,...,9 $b_{10} = numero de grupo$

Resolved el sistema usando Jacobi y Gauss-seidel